

Zeitschrift für Kristallographie

International Journal for Structural, Physical,
and Chemical Aspects of Crystalline Materials

Editors-in-Chief

M. Buerger, Cambridge, MA · S. Haussühl, Köln
H. G. von Schnering, Stuttgart

Editorial Board

G. E. Bacon, Sheffield · E. F. Bertaut, Grenoble
U. K. E. Bonse, Dortmund · P. Hartman, Utrecht
E. Hellner, Marburg/Lahn · E. Liebau, Kiel
A. Niggli, Zürich · M. Renninger, Marburg/Lahn
K. Schubert, Stuttgart · L. A. Shuvalov, Moscow
Y. Takéuchi, Tokyo

Band 150 1979



Akademische Verlagsgesellschaft · Wiesbaden

© Akademische Verlagsgesellschaft Wiesbaden 1979. — Printed in Germany. — Die in dieser Zeitschrift veröffentlichten Beiträge sind urheberrechtlich geschützt. Übersetzung, Nachdruck, Vervielfältigung auf photomechanischem oder ähnlichem Wege oder im Magnettonverfahren, Vortrag, Funk- und Fernsehendung sowie Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen — auch auszugsweise — bleiben vorbehalten. All rights reserved (including those of translations into foreign languages). No part of this issue may be reproduced in any form, by photoprint, microfilm or any other means without written permission from the publishers. Werden von einzelnen Beiträgen oder Teilen von ihnen einzelne Vervielfältigungsstücke im Rahmen des § 54 UrhG hergestellt und dienen diese gewerblichen Zwecken, ist dafür eine Vergütung gem. den gleichlautenden Gesamtverträgen zwischen der Verwertungsgesellschaft Wort (ehemals Inkassostelle für urheberrechtliche Vervielfältigungsgebühren GmbH), Goethestr. 49, D-8000 München 2, und dem Bundesverband der Deutschen Industrie e.V., dem Gesamtverband der Versicherungswirtschaft e.V., dem Bundesverband deutscher Banken e.V., dem Deutschen Sparkassen- und Giroverband und dem Verband der Privaten Bausparkassen e.V., an die VG Wort zu entrichten. Die Vervielfältigungen sind mit einem Vermerk über die Quelle und den Vervielfältiger zu versehen. Erfolgt die Entrichtung der Gebühren durch Wertmarken der VG Wissenschaft, so ist für jedes vervielfältigte Blatt eine Marke im Wert von DM 0,40 zu verwenden.

Herstellung: Wiesbadener Graphische Betriebe GmbH, Wiesbaden

Inhalt von Band 150

Heft 1–4

D. Petrović, B. Ribár, S. Carić, V. Leovac

The crystal structure of dinitrato-(S-methylthiosemicarbazone-8-quinolinealdehyde)-copper(II)-complex 3

E. Makovicky

The crystallographic art of Hans Hinterreiter 13

R. Hoppe

Effective coordination numbers (ECoN) and mean fictive ionic radii (MEFIR) 23

B. W. Liebich, H. Sarp, E. Parthé

The crystal structure of chantalite, $\text{CaAl}_2(\text{OH})_4\text{SiO}_4$ 53

P. Böttcher

Synthesis and crystal structure of the dirubidiumpentachalcogenides Rb_2S_5 and Rb_2Se_5 65

Y. Takéuchi, T. Ozawa, J. Takagi

Tropochemical cell-twinning and the 60 Å structure of phase V in the $\text{PbS}-\text{Bi}_2\text{S}_3$ system 75

A. Nagl

The crystal structure of a thallium sulfosalt, $\text{Ti}_8\text{Pb}_4\text{Sb}_{21}\text{As}_{19}\text{S}_{68}$ 85

D. Grdenić, M. Sikirica

Die Kristallstruktur von Tetrakis(acetoxyquecksilber)methan-Dihydrat 107

J. Bohm

Zur Anzahl kristallographischer Symmetriegruppenarten 115

F. Hulliger

On the usefulness of bond considerations for phase characterization: The 2:1 alkaline-earth pnictides 125

H. Effenberger, J. Zemann

Verfeinerung der Kristallstruktur des Lithiumkarbonates, Li_2CO_3 133

K. Matsumoto, S. Ooi

Absolute configurations and circular dichroism spectra of some Pt(II) chelates of N-substituted diamines 139

L. Pauling

Diamagnetic anisotropy of the carbonate ion in calcite, aragonite, strontianite, and witherite and of other non-cyclic planar atomic groups with resonance structures 155

J. L. Pratt, P. Bayliss

Crystal-structure refinement of cattierite 163

A. Edenharter, T. Peters

Hydrothermalsynthese von TI-haltigen Sulfosalzen 169

T. Matsumoto, H. Wondratschek

Possible superlattices of extraordinary orbits in 3-dimensional space 181

M. Sassoui, R. Hosemann, H. Čačковиć

Lochblenden-Kleinwinkelstreuammer mit absoluter Eichung und ihre Erprobung an Goldsol und Polyäthylen 199

G. Bergerhoff, H. Namgung

Die Kristallstruktur des Cyclo-tetrakis(phenylarsensulfid) 209

K. Mereiter, A. Preisinger, H. Guth, G. Heger, K. Hiebl, W. Mikenda

Hydrogen bonds in Schlippe's salt, $\text{Na}_3\text{SbS}_4 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$ and $\text{Na}_3\text{SbS}_4 \cdot 9\text{D}_2\text{O}$: Diffraction and spectroscopic studies in the temperature range of 75 K to 295 K 215

P. Walpen, A. Niggli

Zur Computer-Analyse der Pattersonfunktion 231

P. Lustenberger, S. Joss, P. Engel, N. Oesch, W. Rutsch,

M. Neuenschwander

Die Molekül- und Kristallstruktur von meso-1,1'-Biindenyl 235

W. Fischer, E. Koch

Geometrical packing analysis of molecular compounds 245

Ch. Chieh

Analysis of cyclotomic sets 261

J. E. Iglesias

Diffraction enhancement of symmetry: Enhancement cases for crystals formed by stacking of two kinds of layers 279

P. B. Moore, T. Araki

Crystal structure of synthetic $\text{Ca}_3\text{Mn}_2^{3+}\text{O}_2[\text{Si}_4\text{O}_{12}]$ 287

H. T. Evans, Jr.

The crystal structures of low chalcocite and djurleite 299

W. W. Adams, L. V. Azároff, A. K. Kulshreshtha

X-ray diffraction by a nematic polybenzothiazole fiber 321

Book reviews 347

Zeitschrift für Kristallographie

International Journal for Structural, Physical,
and Chemical Aspects of Crystalline Materials

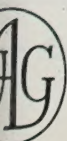
Editors-in-Chief

M. Buerger, Cambridge, MA · S. Haussühl, Köln
H. G. von Schnering, Stuttgart

Editorial Board

G. E. Bacon, Sheffield · E. F. Bertaut, Grenoble
U. K. E. Bonse, Dortmund · P. Hartman, Utrecht
E. Hellner, Marburg/Lahn · E. Liebau, Kiel
A. Niggli, Zürich · M. Renninger, Marburg/Lahn
K. Schubert, Stuttgart · L. A. Shuvalov, Moscow
Y. Takéuchi, Tokyo

Volume 151 1980



Akademische Verlagsgesellschaft · Wiesbaden

© Akademische Verlagsgesellschaft Wiesbaden 1980. — Printed in Germany. — Die in dieser Zeitschrift veröffentlichten Beiträge sind urheberrechtlich geschützt. Übersetzung, Nachdruck, Vervielfältigung auf photomechanischem oder ähnlichem Wege oder im Magnettonverfahren, Vortrag, Funk- und Fernsehsendung sowie Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen — auch auszugsweise — bleiben vorbehalten. All rights reserved (including those of translations into foreign languages). No part of this issue may be reproduced in any form, by photoprint, microfilm or any other means without written permission from the publishers. Werden von einzelnen Beiträgen oder Teilen von ihnen einzelne Vervielfältigungsstücke im Rahmen des § 54 UrhG hergestellt und dienen diese gewerblichen Zwecken, ist dafür eine Vergütung gem. den gleichlautenden Gesamtverträgen zwischen der Verwertungsgesellschaft Wort (ehemals Inkassostelle für urheberrechtliche Vervielfältigungsböhen GmbH), Goethestr. 49, D-8000 München 2, und dem Bundesverband der Deutschen Industrie e.V., dem Gesamtverband der Versicherungswirtschaft e.V., dem Bundesverband deutscher Banken e.V., dem Deutschen Sparkassen- und Giroverband und dem Verband der Privaten Bausparkassen e.V., an die VG Wort zu entrichten. Die Vervielfältigungen sind mit einem Vermerk über die Quelle und den Vervielfältiger zu versehen. Erfolgt die Entrichtung der Gebühren durch Wertmarken der VG Wissenschaft, so ist für jedes vervielfältigte Blatt eine Marke im Wert von DM 0,40 zu verwenden.

Herstellung: Wiesbadener Graphische Betriebe GmbH, Wiesbaden

E. Hellner

Fritz Laves 27. 2. 1906 – 12. 8. 1978 1

F. H. Laves

Similarity and miscibility of inorganic crystals 21

B. Pałosz, J. Przedmojski

Symmetry of reflexion intensity 10.L and its connection with the notation of layer sequence of CdI_2 polytypes for a structure analysis application 31

G. W. Smith, R. Walls

The crystal structure of Görgeyite $\text{K}_2\text{SO}_4 \cdot 5\text{CaSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ 49

Y. Aka, N. Armağan, A. Aydin Uraz

An X-ray diffraction study of barium thiosulphate monohydrate, $\text{BaS}_2\text{O}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$ 61

S. A. Hamid

Tourmaline as a pyroelectric infra-red radiation detector 67

T. Tagai, W. Joswig, M. Korekawa, H. R. Wenk

Die Bestimmung der Al/Si-Verteilung mittels Neutronenbeugung in einem Plagioklas An_{66} 77

S. Merlino

Crystal structure of sapphirine – 1 Tc 91

Ch. Büchele, P. Buck

X-ray topographic and ferroelastic studies of 2 MC– $\text{Sb}_5\text{O}_7\text{J}$ single crystals 101

W. Jung

Die Kristallstrukturen von $\text{Li}_3\text{Ni}_{20}\text{B}_6$ und $\text{Li}_{\sim 3}\text{Ni}_{16}\text{B}_{\sim 8}$ 113

W. Jung, D. Quentmeier

Darstellung und Kristallstruktur der ternären Boride $\text{SrNi}_{12}\text{B}_6$ und $\text{BaNi}_{12}\text{B}_6$ 121

C. Sabelli

The crystal structure of chalcophyllite 129

L. Farkas, P.-E. Werner

Powder diffraction studies on aluminite and meta-aluminite 141

M. Rieder

Back-reflection precession camera, a new instrument in reciprocal-lattice photography 153

Short Communications

R. Guha, D. K. Nag, G. L. Dwivedi

A preliminary report on the structure of ZnMn_3O_7 169

A. Petrović, D. Petrović, G. Bernáth

Crystal data for 2-(p-bromophenyl)-trans-5,6-pentamethyl-2,3,4,6-tetrahydro-1,3-oxazin-4 on $C_{15}H_{18}BrNO_2$ and 2-(p-bromophenyl)-trans-4a,5,6,7,8,8a-hexahydrochinazolin-4(3H) on $C_{14}H_{15}BrN_2O$ 171

W. Jung, D. Quentmeier

The crystal structure of $Ba_2Ni_9B_6$ 172

P. Smith-Verdier, S. Garcia-Blanco

Redetermination of the structure of anhydrous zinc metaborate $Zn_4O(BO_2)_6$ 175

Vol. 151 No. 3/4 1980

K. Ohsumi, Eun-gi Min, R. Sadanaga

A new type of partial diffraction enhancement of symmetry found in CdI_2 polytype 179

G. D. Nigam, B. Deppisch

Redetermination of the structure of 1,4-dihydroxyanthraquinone ($C_{14}H_8O_4$) 185

A. Edenharter

Die Kristallstruktur von Heteromorphit, $Pb_7Sb_8S_{19}$ 193

P. Engel

Die Kristallstruktur von synthetischem Parapirotit, $TiSb_5S_8$ 203

P. Engel

Zur Interpretation der Pattersonsynthese 217

A. M. Zamorzaev, A. F. Palistrant

Antisymmetry, its generalizations and geometrical applications 231

M. Gostojić

Die Kristallstruktur von synthetischem Ellisit, Tl_3AsS_3 249

P. Engel, S. Schönholzer, M. Neuenschwander

Die Molekül- und Kristallstruktur von 3,4-Epoxy-5-Acetyl-5-Methyl-Tricyclo [5.2.1.0^{2,6}] Decan 255

N. I. Leonyuk, R. V. Galiulin, L. I. Al'shinskaya, B. N. Delone

Practical determination of perfect habits of crystals 263

H. von Benda

Zur Polymorphie des Wismuttribromids 271

H. Hess, P. Keller

Die Kristallstruktur von Queitit, $Pb_4Zn_2[SO_4|SiO_4|Si_2O_7]$ 287

W. B. Pearson

Dimensional analysis of phases having the $ThMn_{12}$, $CaCu_5$ and $MgZn_2$ structures: study of the influence of Kagomé nets of atoms 301

T. Srikrishnan, M. Soriano-Garcia, R. Parthasarathy

Orientation and intramolecular hydrogen bonding of nitro groups in the crystal structure of picric acid, $C_6H_3N_3O_7$ 317

F. Scordari, E. Scandale

Merohedric twinning in a sulphate related to Maus' salt and metavoltine 3